



TITLE:

9.Maximum Entropy法による精密  
結晶構造解析(名古屋大学大学院工  
学研究科応用物理学専攻,修士論文  
題目・アブストラクト(1988年度))

AUTHOR(S):

佐藤, 真澄

---

CITATION:

佐藤, 真澄. 9.Maximum Entropy法による精密結晶構造解析(名古屋大学大学院工学研究科  
応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度)). 物性研究 1989, 53(1): 89-90

ISSUE DATE:

1989-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93846>

RIGHT:

## 8. Si(111) 7×7 表面における動的過程

河 本 滋

Si(111) 7×7 表面構造の、加熱およびアルカリ金属 (Li・K) 吸着による変化を、主に反射高速電子回折 (RHEED) 強度ロッキング曲線により解析した。高温での 1×1 構造に於いては、7×7 構造で存在した二量体結合が消失し、バルク状 (111) 表面上に約 1/4 原子層の adatom がランダムに存在する事が示された。微量の Li の吸着によっては、7×7 構造内の殆どどの adatom のバックボンドが切断されることが判った。また、この Li 吸着状態に於いては、300°C という比較的低い温度でも二量体結合の切断が起こった。これらの事から、adatom のバックボンドは異種原子の吸着により容易に切断されるが、二量体結合は切断されないと言える。しかしながら、adatom のバックボンドが切断されている場合には、7×7 構造の二量体結合は比較的低温でも容易に切断されると結論できる。

## 9. Maximum Entropy法による精密結晶構造解析

佐 藤 真 澄

現在、回折結晶学では、例えば、ペンデル干渉法など測定技術の進歩、SR光などの施設面の充実、等々により、かなり高精度で高信頼性のある測定が行われるようになった。それに伴い、構造解析では、より微細な構造が注目されるようになり、結晶内電子密度分布を詳細に求めようとする研究が盛んとなっている。

現在の方法では、このような詳細な解析を行うためには、精密な構造モデルを考えなければならない。しかし、構造モデルの精密化は、通常有意性の低いパラメータの増加を伴う。それ故、このような解析は、非常に複雑で、困難を伴うことが多い。

そこで本研究では、構造モデルをたてずに、電子密度分布を定め

ることのできる Maximum Entropy 法 (MEM) を精密結晶構造解析に応用することを試みた。MEM は、一種の統計的推論法であり、現在得られるような精密な測定値を用いれば、詳細な電子密度分布を一義的に推定することができると思われる。実際に MEM を用いて、Si 及び CsPbCl<sub>3</sub> の解析を行ってみると、Si に対しては、禁制反射の測定値を用いなかったにも関わらず、結合電子を含めた詳細な電子密度分布を、一義的に定められるということがわかった。そして、中性子回折の測定値から解析した CsPbCl<sub>3</sub> では、MEM により推定された核密度分布より、その原子配列を求めることができ、一義的に任意の原子変位モーメントを得ることができるということが明らかとなった。

以上の解析より、MEM は、精密結晶構造解析に対して、非常に有用な方法であると結論することができた。

## 10. 運転者の意識による交通流の変化の研究

下 広 大 治

総走行距離が、個々の自動車の運転法によって、どの様に変化するか調べるのが本研究の目的である。

従来の交通流の研究は、交通流を流体と考え連続体で近似している。それに対して本研究では、個々の車の動きを直接調べている。

まず、片側一車線の道路に対して、それぞれの車の運転特性を数式で表す。式に制約条件を与える車間距離や急加減速の限界は現実的に定める。式中のパラメータは、総走行距離も考慮して最適値に定めた。

次に片側二車線の道路に対して、車線変更のルールを数式で表現する。個々の車の運転特性である自由速度と車線変更のしかたをいろいろ変化させたときの交通流の状態をモンテカルロシミュレーションで調べる。